

Discrimination de profils qualitatifs
de moûts de raisin
par spectroscopie moyen infrarouge
et transfert inter-instruments

15èmes rencontres HélioSPIR

Jordane LALLEMAND - Ondalys

Sylvie ROUSSEL – Ondalys

Carole FEILHES, Eric SERRANO – Institut Français de la Vigne et du Vin – V'Innopôle Sud-Ouest

Julie PEREA, Pascal NACENTA, Jacques TRANIER – Groupe Vinovale, cave de Fronton



Plan de la présentation

- A. Présentation du projet
- B. Matériel et méthodes
 - 1. Méthodes de transfert spectroscopique
 - 2. Méthode de discrimination multivariée
- C. Résultats
 - 1. Transfert spectroscopique
 - 2. Discrimination du potentiel aromatique des vins
- D. Conclusion et perspectives



A. Présentation du projet

o Projet collaboratif R&D FUI **VINNEO** 2009-2012

Projet VINNEO : Du consommateur à la vigne

Mise au point de technologies favorisant

**l'automatisation de la sélection de la matière première
et l'industrialisation des procédés d'élaboration
des vins de cépages autochtones du Sud-Ouest**



o Rôle d'Ondalys au sein de VINNEO :

- Modélisation du potentiel qualitatif des moûts de raisin
- Conception d'un outil d'aide à la décision



A. Présentation du projet Méthodologie expérimentale

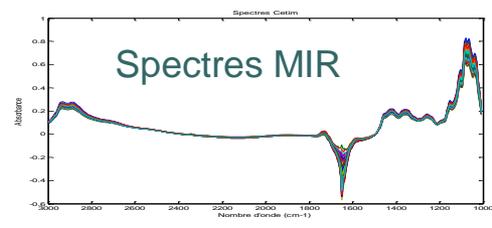
3 cépages rouges:
NEGRETTE
MALBEC
FER SERVADOU

Echantillonnage à la parcelle de 600 baies
durant le contrôle maturité : 5 jours avant la récolte

40 à 50 parcelles
par cépage
par millésime



Acquisition des spectres IRTF
sur les moûts de raisin
Spectromètres CETIM ET FOSS
3000cm⁻¹ à 1010cm⁻¹



- Raisins pressés
- Moûts centrifugés
- Mesure en transmittance

Vinifications expérimentales
par cépage et par millésime
(2009 – 2010 – 2011)



Dégustation par un jury expert
→ Classement des vins :
• Qualité aromatique du vin : fruité (+) / végétal (-)
• Structure du vin : structuré A / non structuré (B)





A. Présentation du projet

Objectif

1. Modéliser la qualité du vin à partir de mesures IRTF sur les goûts
 - Discrimination de 2 classes de qualité du vin :
 - Qualité aromatique du vin : fruité (+) / végétal (-)
2. Modèle applicable directement sur l'appareil de la cave coopérative
 - Transferts inter-spectromètres



Plan de la présentation

- A. Problématique
- B. Matériel et méthodes**
 - 1. Méthodes de transfert spectroscopique**
 - 2. Méthode de discrimination multivariée
- C. Résultats
 - 1. Transfert spectroscopique
 - 2. Discrimination du potentiel aromatique des vins
- D. Conclusion et perspectives

B. Matériel et méthodes

1. Méthodes de transfert spectroscopique

- Approche de transfert spectroscopique « forward »
 - 1^{er} transfert : Spectres CETIM transformés en spectres FOSS labo
 - 2nd transfert : Spectres FOSS labo transformés en spectres FOSS cave
- Construction d'un modèle adapté à la cave
1. Optimisation du nombre d'échantillons standards
 1. Séparation d'un jeu d'étalonnage et de validation : méthode Duplex
 2. Jeu de standardisation : 10 à 50 échantillons sélectionné dans la base d'étalonnage : algorithme basé sur le levier (*Matlab, PLS-Toolbox, stdsslct.m*)
 2. Comparaison des différentes méthodes de transfert spectroscopique
 - Performance comparée par divers critères : proximité des échantillons (ACP), statistiques de variance, performances en discrimination,...

B. Matériel et méthodes

1. Méthodes de transfert spectroscopique

- **DS** Direct Standardisation, *Y.D. Wang et al., 1991*
- **PDS** Piecewise Direct Standardisation, *Y.D. Wang et al., 1991*
- **SWS** Single Wavelength Standardisation, *L. Nørgaard, 1995*
- **Orthogonalisation** External Parameter Orthogonalisation, *J.-M. Roger, et al., 2003*
Transfer by Orthogonal Projection, *A. Andrew et al., 2004*
- **CLONE** Shenk & Westerhaus method, *J.S. Shenk et al., 1985*
- **FIR** Finite Impulse Filter, *T.B. Blank et al., 1996*
- **SWD** Standardization in the Wavelet Domain, *B. Walczack et al., 1997*
- **Local centering** *J. Sjöblom et al., 1998*
- **Transfer on PCA scores** *K.S. Park et al., 2001*
- *Etc...*

B. Matériel et méthodes

1. Méthodes de transfert spectroscopique

- o DS, PDS, SWS

Principe : une régression est établie entre chaque longueur d'onde de S_2 (référence) et les longueurs d'onde de S_1 (explicative)

→ Chaque longueur d'onde j de $S_{2=FOSS}$ est expliquée par :

- Direct Standardisation (DS)
 - les p longueurs d'onde de $S_{1=CETIM}$
- Piecewise Direct Standardisation (PDS)
 - les longueurs d'onde $[j-k : j+k]$ de $S_{1=CETIM}$ → fenêtre glissante
- Single Wavelength Standardisation (SWS)
 - La longueur d'onde j de $S_{1=CETIM}$

B. Matériel et méthodes

1. Méthodes de transfert spectroscopique

o Orthogonalisation (*variante de TOP/EPO*)

1. Différences spectrales entre les standards des deux instruments
 - $D = S_{1=\text{CETIM}} - S_{2=\text{FOSS}}$
2. Modélisation de ces différences par ACP sur k composantes principales (paramètre à régler)
 - $D^k = T^k \cdot P^k$
3. Orthogonalisation des spectres d'étalonnage
 - $X_{2=\text{FOSS}^*} = X_{1=\text{CETIM}} - X_{1=\text{CETIM}} \cdot P^k \cdot P^{kT}$

ATTENTION : appliquer l'orthogonalisation à **TOUS** les spectres d'étalonnage ($X_{1=\text{CETIM}}$ et $X_{2=\text{FOSS}}$)



Plan de la présentation

A. Problématique

B. Matériel et méthodes

1. Méthodes de transfert spectroscopique
2. **Méthode de discrimination multivariée**

C. Résultats

1. Transfert spectroscopique
2. Discrimination du potentiel aromatique des vins

D. Conclusion et perspectives

B. Matériel et méthodes

2. Méthode de discrimination

○ Prétraitements

- Sélection de larges bandes spectrales
- Prétraitements classiques : Dérivées 1^{ères} et 2^{ndes}, SNV
- Amélioration de la répétabilité des duplicats :
Error Removal by Orthogonal Subtraction (EROS)
→ Modélisation des différences entre répétitions puis orthogonalisation

*Zhu, Y., T. Fearn, et al. **Journal of Chemometrics** 22, 130-134. (2008)*

○ PLS-AFD

- PLS (*Partial Least-Squares Reg.*) avec codage disjonctif des classes
 - $y = 1$ (fruité), $y = 0$ (végétal)
- AFD (*Analyse Factorielle Discriminante*) sur les scores de la PLS
 - Classes 1 / 0 (Fruité / Végétal)
 - Degrés d'appartenance au fruité entre 0 et 1



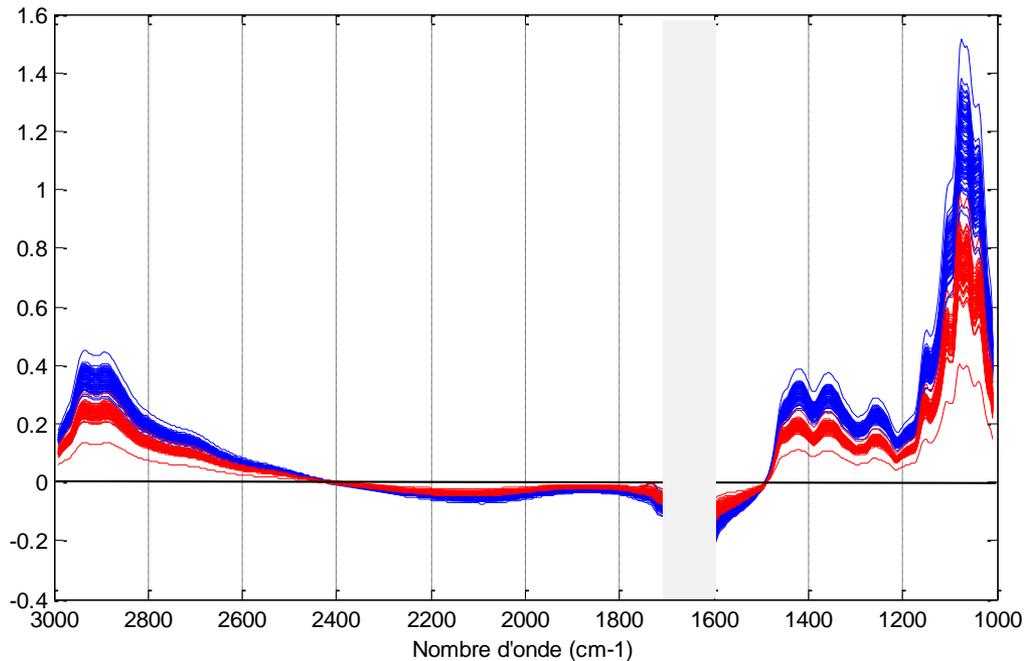
Plan de la présentation

- A. Présentation du projet
- B. Matériel et méthodes
 - 1. Méthodes de transfert spectroscopique
 - 2. Méthode de discrimination multivariée
- C. Résultats**
 - 1. Transfert spectroscopique**
 - 2. Discrimination du potentiel aromatique des vins
- D. Conclusion et perspectives

C. Résultats – Cépage Négrette

1. Transfert spectroscopique

- Différences spectrales entre les deux spectromètres
 - S/N meilleur pour FOSS que CETIM (plus bruité)
 - Effet multiplicatif global
 - Légers décalages de pics



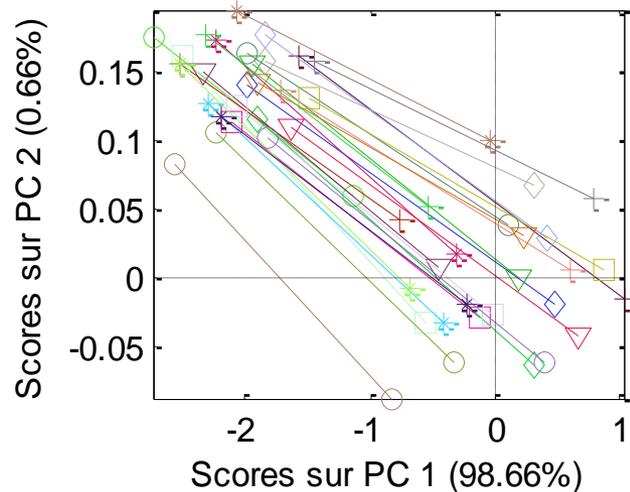
Spectres MIR de moûts
→ majoritairement signal sucre et acidité

C. Résultats - Cépage Négrette

1. Transfert spectroscopique

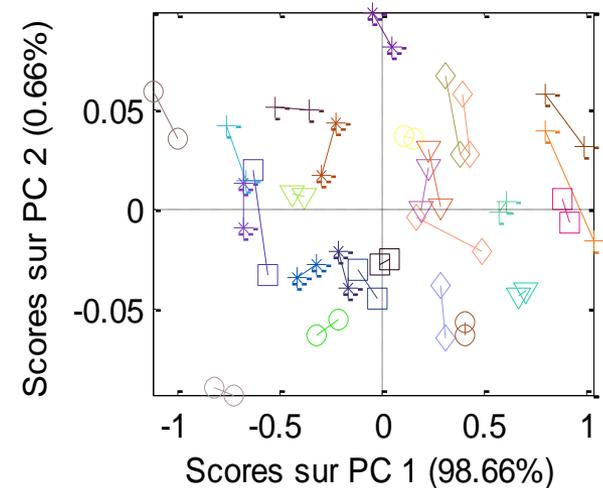
- Exemple du 1^{er} transfert (échantillons de validation)
 - ACP sur les spectres FOSS 2009
 - Projection des spectres CETIM 2009

Avant transfert



Après transfert

PDS, 3 points, 25 standards



- Même stratégie appliquée au 2nd transfert



Plan de la présentation

- A. Présentation du projet
- B. Matériel et méthodes
 - 1. Méthodes de transfert spectroscopique
 - 2. Méthode de discrimination multivariée
- C. Résultats**
 - 1. Transfert spectroscopique
 - 2. Discrimination du potentiel aromatique des vins**
- D. Conclusion et perspectives

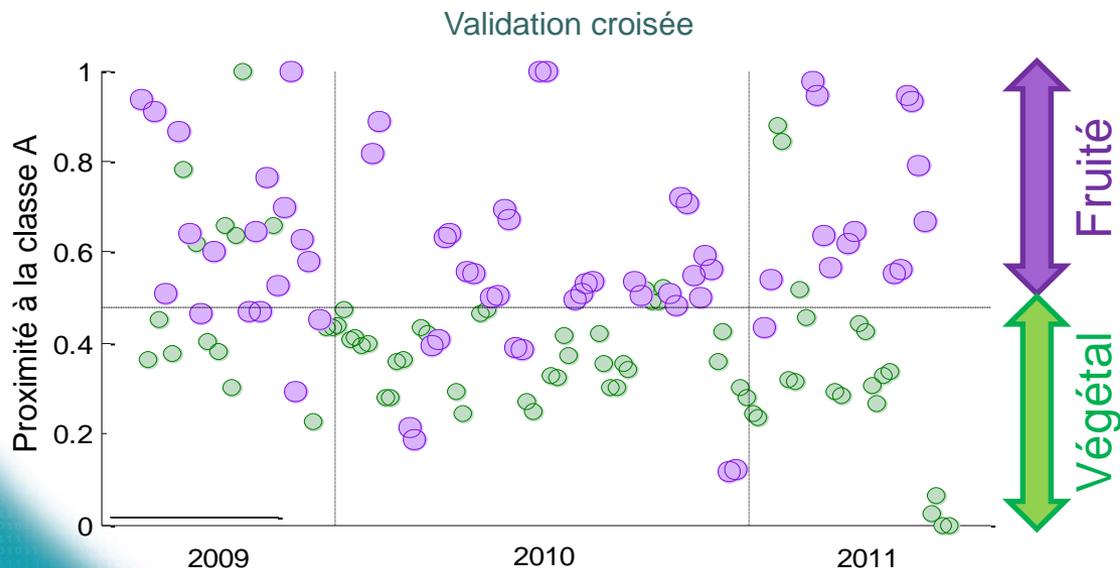
C. Résultats - Cépage Négrette

2. Discrimination



o Modèle FOSS cave 2009+2010+2011

- Prétraitements : EROS (2CPs) + sélection de bandes de longueurs d'onde
- PLS (3 Variables latentes) → pas de sur-apprentissage
- Performances en validation croisée
 - 80% des échantillons bien classés
 - OAD: **4 apports de vendanges sur 5** sont bien triés et vinifiés



Validation croisée		Classes vraies		Pureté (%)
		Fruité (+)	Végétal (-)	
Classes prédites	Effectif	66	71	
Fruité (+)	65	52	13	80%
Végétal (-)	72	14	58	81%
Sensibilité (%)		79%	82%	
Bien classés (validation croisée)				80.3%
Bien classés (Étalonnage)				81.8%



Plan de la présentation

- A. Présentation du projet
- B. Matériel et méthodes spectroscopique
 - 1. Méthodes de transfert spectroscopique
 - 2. Méthode de discrimination multivariée
- C. Résultats
 - 1. Transfert spectroscopique
 - 2. Discrimination du potentiel aromatique des vins
- D. Conclusion et perspectives**

D. Conclusion

- Transfert inter-instruments nécessaire
 - ➔ 2 appareils ne sont pas complètement identiques ! Même en MIR...
 - ➔ Transfert entre deux marques
 - ➔ Transferts entre instruments de même marque
(plusieurs caves coopératives)
- Méthode la plus performante : PDS (3 pts)
- Résultats de la discrimination satisfaisants
 - 3 millésimes intégrés aux bases de données
 - 3/4 à 4/5 des apports de vendanges bien orientés selon le cépage
- ➔ **Mise en place d'un outil d'aide à la décision**
 - **Identification des bennes à fort potentiel aromatique**
 - **Orientation vers une vinification spécifique**



Je vous remercie pour votre attention

Des questions ?

Remerciements :

Vinovalie, groupement de caves du Sud-Ouest
L'IFV Sud-Ouest

Ainsi que l'équipe d'HélioSPIR